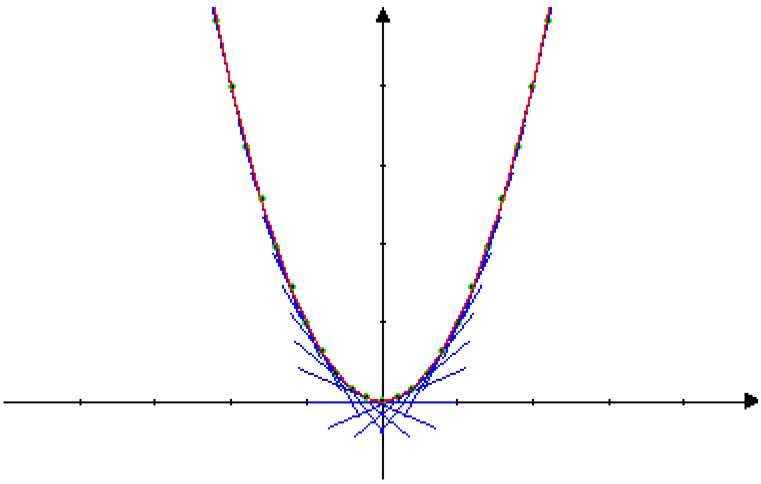
Hamiltonsche Mechanik

Manfred Hörz

Hamiltons Ansatz für die analytische Mechanik bedeutet einen ganz neuen Weg, der für die theoretische Physik von großen Nutzen ist. Einige seiner Methoden führen direkt in die Quantenmechanik.

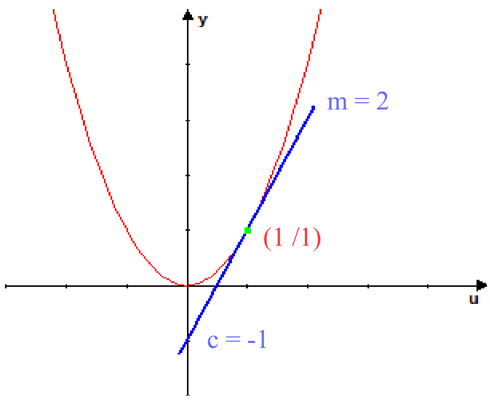
1. Legendre-Transformation

Den Graph einer konvexen Funktion (also einer Funktion bei der zu je zwei Punkten ihres Graphen die Verbindungsstrecke oberhalb des Graphenabschnitts liegt; wie das bspw. für die Normalparabel gilt) kann man auch als die Einhüllende (Enveloppe) ihrer Tangenten beschreiben:



Man ordne einem Punkt $(u/f(u))$ der Funktion $u \rightarrow f(u)=u^2$ die entsprechende Tangente zu: $t: y=f(u)+f'(u)(x-u)$ und schreibt sie in der Standardform $y=mx+c$: indem man für $x=0$ setzt und den y-Achsenabschnitt c der Tangente als $c=f(u)+f'(u)(0-u)$ oder $c=f(u)-u f'(u)$ erhält, so dass die Tangente durch die Parameter m und c bestimmt ist: $(m/c)=(f'(u)/f(u)-u f'(u))$.

Man hat dann die Zuordnung des Punktes $(u/f(u))$ zur Tangente in der Form $(u/f(u)) \rightarrow (f'(u)/f(u)-u f'(u))$, bspw. $(1/1) \rightarrow (2/-1)$



$(1/1) \rightarrow (2/-1)$

Umgekehrt kann man von der Tangente mit den Parametern $(2/-1)$ auch wieder den Punkt des Graphen berechnen, nämlich als Schnittpunkt des Graphen von f und der Tangente:

$$\begin{matrix} y=2x-1 \\ y=x^2 \end{matrix} \Rightarrow x^2=2x-1 \Rightarrow (x-1)^2=0 \Rightarrow x=1 \wedge y=1 \quad \text{also} \quad (1/1) \quad .$$

Schreibt man $f'(u)=:v(u)=v$ oder $(df=v\,du)$, so ist die Zuordnung
$(u/f(u)) \rightarrow (f'(u)/f(u)-u\,f'(u))$
auch $(u/f(u)) \rightarrow (v/f(u(v))-u(v)\cdot v)$ indem man $f'(u)=v$ nach u auflöst:
$u=f'^{-1}(f'(u))=f'^{-1}(v)=u(v)$. Man bezeichnet die funktionale Beziehung
$(v/f(u(v))-u(v)\cdot v)$ mit $v \rightarrow g(v):=f(u(v))-u(v)\cdot v$ als die Legendre-Transformierte von f, auch mit f^L bezeichnet.

Für das Beispiel $u \rightarrow f(u)=u^2$: $f'(u)=2u=:v=v(u)$ und $u=u(v)=\frac{1}{2}v=\frac{1}{2}v(u)$ und $f(u(v))=u^2|_{u=\frac{1}{2}v}=\frac{1}{4}v^2$ und somit $g(v)=f^L(v)=\frac{1}{4}v^2-\frac{1}{2}v\cdot v=-\frac{1}{4}v^2$.

Betrachtet man die beiden Ableitungen $f'(u)=2u=v$ und $f^{L\prime}(v)=-\frac{1}{2}v=-u$, so sind sie beinahe invers zueinander. Um dies zu erreichen, wählt man anstatt c auch $-c$ und erhält dann

$f^L(v)=u(v)\cdot v-f(u(v))$, womit die Inversität der Ableitungen garantiert wird:

$u \overset{f'=\frac{df}{du}}{\rightarrow} v \overset{g'=\frac{dg}{dv}}{\rightarrow} u$ und $v \overset{g'}{\rightarrow} u \overset{f'}{\rightarrow} v$, also $g'(f'(u))=u$ und $f'(g'(v))=v$ oder

$g'\circ f'=id_u$ und $f'\circ g'=id_v$.

Geht man von einer Funktion f in n Variablen $\boldsymbol{u}=(u_1,\ldots,u_n)$ aus: $f=f(\boldsymbol{u})=f(u_1,\ldots,u_n)$ und wählt die partiellen Ableitungen von f: $\frac{\partial f}{\partial u_i}=:v_i$ kann man eine neue Funktion $g=f^L$ definieren:

$$f^L:=\sum_{i=1}^{n} u_i v_i - f \quad .$$

Zwischenbemerkung: Wie oben gesehen, kann die Transformierte auch negativ angegeben werden:

$f^L:=f-\sum_{i=1}^{n} u_i v_i$, in welcher Form sie in der Thermodynamik angewendet wird.

Nimmt man das Differenzial von g unter Beachtung der Linearität des Differenzials und der

Produktregel: $dg=\sum_{i=1}^{n}(u_i\,dv_i+v_i\,du_i)-\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial u_i}du_i=\sum_{i=1}^{n}u_i\,dv_i+\sum_{i=1}^{n}\left(v_i-\frac{\partial f}{\partial u_i}\right)du_i=\sum_{i=1}^{n}u_i\,v_i$, da $v_i-\frac{\partial f}{\partial u_i}=0$ und damit $dg=\sum_{i=1}^{n}u_i\,dv_i$, so sieht man, dass g eine Funktion in Abhängigkeit der

v_i ist: $g = g(v_1, \ldots, v_n) = g(\boldsymbol{v})$. Und daraus folgt weiter $dg = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial g}{\partial v_i} dv_i$ mit $u_i = \frac{\partial g}{\partial v_i}$.

Damit hat man eine schöne Symmetrie in den beiden gegenseitigen Darstellungen von f und g:

$f = f(u_1, \ldots, u_n)$ mit $\frac{\partial f}{\partial u_i} = v_i$ und $g(v_1, \ldots, v_n) = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i - f(u_1, \ldots, u_n)$ einerseits und

$g = g(v_1, \ldots, v_n)$ mit $\frac{\partial g}{\partial v_i} = u_i$ und $f(u_1, \ldots, u_n) = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i - g(v_1, \ldots, v_n)$ andrerseits.

Sind nicht alle Variablen an der Transformation beteiligt, sondern nur $u_1, \ldots, u_n$, die **aktiven Variablen**, und die übrigen von ihnen unabhängigen Variablen $w_1, \ldots, w_m$, die die **passiven** heißen, nicht, so dass die Funktion $f = f(u_1, \ldots, u_n, w_1, \ldots, w_m)$ wieder in f^L transformiert wird mit $\frac{\partial f}{\partial u_i} =: v_i \quad (i = 1, \ldots, n)$, dann ergibt sich

$$f^L = \sum_{i=1}^{n} u_i v_i - f(u_1, \ldots, u_n, w_1, \ldots, w_m)$$

Das Differenzial von f^L ist: $df^L = \sum_{i=1}^{n} (u_i dv_i + v_i du_i) - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial u_i} du_i - \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f}{\partial w_i} dw_i =$

$= \sum_{i=1}^{n} u_i dv_i + \sum_{i=1}^{n} \left(v_i - \frac{\partial f}{\partial u_i} \right) du_i - \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f}{\partial w_i} dw_i = \sum_{i=1}^{n} u_i dv_i - \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f}{\partial w_i} dw_i$. Andrerseits ist das

Differenzial von f^L , da $f^L = f^L(v_1, \ldots, v_n, w_1, \ldots w_m)$ folgende LK:

$df^L = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f^L}{\partial v_i} dv_i + \sum_{i=1}^{m} \frac{\partial f^L}{\partial w_i} dw_i$, sodass der Vergleich der beiden Gleichungen für df^L ergibt:

$$\frac{\partial f^L}{\partial w_i} = -\frac{\partial f}{\partial w_i}$$

2. Anwendung in der Thermodynamik

Ist ein physikalisches System gegeben, dessen potenzielle Energie oder kinetische Energie als ein Ganzes bezüglich der Umgebung nicht interessiert, wohl aber die energetischen Möglichkeiten innerer Transformation, so wird dieses Reservoir an Energie die ***innere Energie U*** des Systems genannt. Ist das System abgeschlossen, so ist die innere Energie konstant, und befindet es sich im thermodynamischen Gleichgewicht, so ist seine **Entropie S** maximal: $dS = 0$. Wichtige Größen eines thermodynamischen Systems sind zusätzlich das **Volumen V**, die **Temperatur T**, der **Druck p**, **Teilchenzahl N** und die ***Enthalpie H***. Außer den thermodynamischen Potenzialen U und H gibt es noch sechs weitere, wovon noch die ***Helmholtz freie Energie F*** und die ***Gibbs-Energie G*** genannt werden sollen.

Die innere Energie U ist eine Funktion der Entropie S und des Volumens V und eventuell der Teilchenzahl N: $U = U(S, V, N)$ oder bei konstanter Stoffmenge $U = U(S, V)$.

Der **erste Hauptsatz der Thermodynamik** beschreibt die Änderung der inneren Energie als

Summe aus Wärmezufuhr/Wärmeabfuhr in/aus das/dem System und der Arbeit, die das abgeschlossene System ausführt:

$$dU = \delta Q + \delta W = T\,dS - p\,dV \quad .$$

Da andrerseits hier $U = U(S, V)$ ist $dU = \frac{\partial U}{\partial S} dS + \frac{\partial U}{\partial V} dV$, sodass gilt

$\frac{\partial U}{\partial S} = T$ und $\frac{\partial U}{\partial V} = -p$.

Die anderen thermodynamischen Potenziale (die Energien sind: also freie Energie, Enthalpie und Gibbs-Energie) kann man nun mithilfe der Legendre-Transformation aus der inneren Energie herleiten.
Beispielsweise soll die *freie Energie F* eines idealen Gases betrachtet werden, bei dem das Volumen V (und die Teilchenzahl N) konstant ist, $U = U(S)$:

$U^L = U - \left(S \frac{\partial U}{\partial S}\right) = U - ST$ ist die Legendre-Transformierte von U. Es gilt also $F = U - TS$

F ist eine Funktion von T und V. Um das zu sehen, bilde man das Differenzial dF :

$$dF = dU - d(TS) = dU - TdS - SdT = (TdS - pdV) - TdS - SdT = -p\,dV - S\,dT \quad .$$

Also ist F in der Tat eine Funktion in T und V.

Für die *Enthalpie* $H = H(S, p)$ ist die Herleitung über Legendre aus der inneren Energie $U = U(V)$, S konstant:

$$H = U^L = U - V \frac{\partial U}{\partial V} = U - V(-p) = U + pV \Rightarrow H = U + pV$$

mit $dH = dU + d(pV) = dU + p\,dV + V\,dp = (TdS - pdV) + p\,dV + V\,dp = TdS + Vdp$ ist H in der

Tat eine Funktion in S und p.

Für die *Gibbs-Energie* $G = G(T, p)$ ist keine Variable fest (T, p und S, V sind alle verschieden), so dass jetzt gilt für die innere Energie $U = U(S, V)$ und damit:

$$G = U^L = U - S \frac{\partial U}{\partial S} - V \frac{\partial U}{\partial V} = U - ST - V(-p) = U - TS + pV \Rightarrow G = U - TS + pV \quad .$$

$dG = dU - d(TS) + d(pV) = dU - TdS - SdT + p\,dV + V\,dp = (TdS - pdV) - TdS - SdT + pdV + V\,dp \Rightarrow$
$dG = V\,dp - SdT$, also ist G Funktion von p und T.

3. Anwendung auf die Lagrangefunktion

Die Lagrange-Funktion ist $L = L(q_1, \ldots, q_n, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t)$. Für die Legendre-Transformation sind die $\dot{q}_i$ die *aktiven* und q_i und t die passiven Variablen. Die transformierte Funktion heiße H. Die Transformation sei nach der Form $f^L=\sum_{i=1}^{n} u_i \frac{\partial f}{\partial u_i} - f$. Da $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=p_i$ der generalisierte konjugierte Impuls ist, lautet die Transformierte $H=\sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t)$.

$$dH=\sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - dL = \sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^{n} p_i d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt =$$

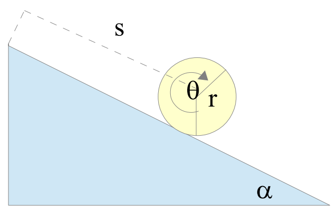
$= \sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i dp_i - \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt$, also ist H Funktion von p_i, q_i und t . Also ist

$\boxed{H(q_i, p_i, t)=\sum_{i=1}^{n} \dot{q}_i p_i - L(q_i, \dot{q}_i, t)}$. Sie heißt die **Hamilton-Funktion**.

Beispiel 1: Gegeben sei ein freies Teilchen. $L=T-V=\frac{1}{2} m \dot{\boldsymbol{q}}^2=\frac{m}{2} \dot{q}_1{}^2+\frac{m}{2} \dot{q}_2{}^2+\frac{m}{2} \dot{q}_3{}^2$

$$p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=m \dot{q}_i \Rightarrow \dot{q}_i=\frac{p_i}{m} \qquad H=\sum_{i=1}^{3} \frac{p_i^2}{m} - \sum_{i=1}^{3} \frac{m}{2} \frac{p_i^2}{m^2}=\sum_{i=1}^{3} \frac{p_i^2}{2\mathrm{m}}=\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2\mathrm{m}}$$

Beispiel 2: Eine Scheibe der Masse m mit Radius r rolle eine schiefe Ebene der Länge l hinab ohne zu rutschen.



Der Neigungswinkel der schiefen Ebene sei α , die zurückgelegte Strecke s und der Winkel um die sich die Scheibe bisher gedreht hat sei θ .

Das Trägheitsmoment der Scheibe ist $I=\frac{1}{2} m r^2$ und die kinetische Energie $T=\frac{1}{2} m \dot{s}^2+\frac{1}{2} I \dot{\theta}^2$. Die potentielle Energie ist $V=mg(l-s)\sin\alpha$. Damit ist die Lagrange-Funktion

$$L(s, \theta, \dot{s}, \dot{\theta}, t)=T-V=\frac{1}{2} m \dot{s}^2+\frac{1}{2} I \dot{\theta}^2+mg(s-l)\sin\alpha=\frac{1}{2} m \dot{s}^2+\frac{1}{4} m r^2 \dot{\theta}^2+mg(s-l)\sin\alpha \quad .$$

Die Hamilton-Funktion ist also

$H(s, \theta, p_s, p_\theta, t)=p_s \dot{s}+p_\theta \dot{\theta}-\left(\frac{1}{2} m \dot{s}^2+\frac{1}{4} m r^2 \dot{\theta}^2+mg(s-l)\sin\alpha\right)$ wobei die generalisierten

Impulse $p_s=\frac{\partial L}{\partial \dot{s}}=m\dot{s}\Rightarrow\dot{s}=\frac{p_s}{m}$ und $p_\theta=\frac{\partial L}{\partial\dot{\theta}}=\frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}\Rightarrow\dot{\theta}=2\frac{p_\theta}{mr^2}$ sind. Also hat man für H:

$$H=\frac{p_s^2}{m}+2\frac{p_\theta^2}{mr^2}-\frac{p_s^2}{2m}-\frac{p_\theta^2}{mr^2}+mg(l-s)\sin\alpha=\frac{p_s^2}{2m}+\frac{p_\theta^2}{mr^2}+mg(l-s)\sin\alpha \quad .$$

4. Hamiltons kanonische Gleichungen (Hamiltonsche Bewegungsgleichungen)

Bei der Herleitung der Hamiltonfunktion aus der Lagrange-Funktion die Variablen $\dot{q}_i$ die aktiven und q_i, t die passiven waren, gilt $\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}=p_i$ und symmetrisch $\frac{\partial H}{\partial p_i}=\dot{q}_i$.

Weiter gilt aus dem gleichen Grund und wegen der Beziehung zwischen aktiven und passiven Variablen insbesondere $-\frac{\partial H}{\partial q_i}=\frac{\partial L}{\partial q_i}$.

Aufgrund der Euler-Lagrange-Gleichung ist $\frac{\partial L}{\partial q_i}=\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}$ und wegen $\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}=p_i$ gilt $\frac{\partial L}{\partial q_i}=\dot{p}_i$ und mit $-\frac{\partial H}{\partial q_i}=\frac{\partial L}{\partial q_i}$ ergibt das $\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$.

Damit hat man mit $\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$ und $\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$ die wichtigen Hamiltonschen kanonischen

Gleichungen. Sie sind die gekoppelten **Bewegungsgleichungen des Systems** in der Form von 2n Differenzialgleichungen 1. Grades.
(Man erkennt da eine gewisse Ähnlichkeit zu den DG der elektromagnetischen Wellen: $\dot{B}=-rot\,E$ und $\dot{E}=rot\,B$.)

Eine andere Art, die kanonischen Gleichungen (Hamiltonschen Bewegungsgleichungen) herzuleiten, wäre:

Leitet man $H(q_i, p_i, t)=\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_i p_i - L(q_i,\dot{q}_i,t)$ nach q_i partiell ab, so erhält man:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i}=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial q_i}\dot{q}_i p_i-\frac{\partial}{\partial q_i}L=0-\frac{\partial L}{\partial q_i}\overset{\text{Euler-Lagrange-Gl.}}{=}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\overset{\text{generalisierter Impuls}}{=}-\frac{d}{dt}p_i=-\dot{p}_i$$

und nach dem generalisierten Impuls abgeleitet:

$$\frac{\partial H}{\partial p_i}=\frac{\partial}{\partial p_i}\sum_{j=1}^{n}\dot{q}_j p_j-\frac{\partial}{\partial p_i}L(q_i,\dot{q}_i,t)=\dot{q}_i-0=\dot{q}_i$$. Damit hat man wieder die kanonischen

Gleichungen.

Nimmt man die partielle Ableitung von H nach der Zeit, erhält man direkt $\frac{\partial H}{\partial t}=-\frac{\partial L}{\partial t}$.

Für die totale Ableitung nach der Zeit ergibt das mit Berücksichtigung der kanonischen

Gleichungen:

$$\frac{d}{dt} H(q(t), p(t), t) = \frac{\partial H}{\partial q}\dot{q} + \frac{\partial H}{\partial p}\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial t} = -\dot{p}\dot{q} + \dot{q}\dot{p} + \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t}$$, also $\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$ und

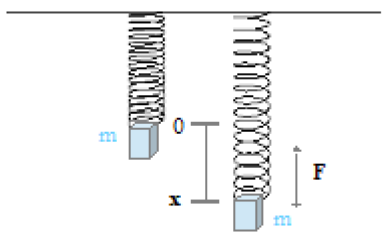
mit $\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}$ hat man $\frac{dH}{dt} = -\frac{\partial L}{\partial t}$. Falls die Lagrange-Funktion nicht explizit von der Zeit abhängt, also $\frac{\partial L}{\partial t} = 0$, so ist die Hamilton-Funktion konstant, also eine Erhaltungsgröße.

Die Hamiltonsche Funktion bestimmt über ihre Bewegungsgleichungen die **zeitliche Entwicklung** der Teilchenorte und der Teilchenimpulse.

In der Quantentheorie erhält man meist durch die kanonische Quantisierung den **Hamiltonoperator** $\boldsymbol{H}$, indem man $H = H(q, p, t)$ als Funktion der Ortsoperatoren $\boldsymbol{q}$ und Impulsoperatoren $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y, p_z)$ mit $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ etc. oder $\boldsymbol{p} = -i\hbar\nabla$ betrachtet, wobei noch die kanonischen Vertauschungsrelationen zu beachten sind. Der Hamiltonoperator bestimmt dann in der Quantentheorie die Zeitentwicklung des Zustandsvektors $|\psi>$ in der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\frac{\partial|\psi>}{\partial t} = -i\boldsymbol{H}|\psi> \quad .$$

Beispiel: Ein reibungsfreier harmonischer Oszillator mit Masse m und Federkonstante k hat die



potentielle Energie $V = \frac{1}{2}kx^2$ und die kinetische Energie $T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$, was die Lagrange-Funktion zu $L = T - V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2$ ergibt. Zunächst soll die Hamilton-Funktion angegeben werden:

$H(x, p_x, t) = \dot{x}p_x - L(x, \dot{x}, t)$ mit $p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x}$ oder $\dot{x} = \frac{p_x}{m}$, also

$$H = \frac{p_x^2}{m} - \frac{1}{2}m\frac{p_x^2}{m^2} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}\frac{p_x^2}{m} + \frac{1}{2}kx^2 \Rightarrow H(x, p_x, t) = \frac{1}{2\mathrm{m}}p_x^2 + \frac{1}{2}kx^2 \quad .$$

Hieraus die kanonischen Gleichungen: $\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m}$ und $\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x} = -kx$.

Für die zeitliche Impulsentwicklung: $\dot{x}(t) = \frac{p_x(t)}{m}$ und $\dot{x}(t) = -\frac{1}{k}\ddot{p}_x(t) \Rightarrow \ddot{p}_x(t) + \frac{k}{m}p_x(t) = 0$.

Zur Lösung dieser DG:

die charakteristische Gleichung ist $\lambda^2+\frac{k}{m}=0 \Rightarrow \lambda_{1,2}=\pm\sqrt{\frac{k}{m}}i$ und die allgemeine Lösung ist

$p_x(t)=C_1 e^{i\sqrt{\frac{k}{m}}t}+C_2 e^{-i\sqrt{\frac{k}{m}}t}$ oder in trigonometrischer Form

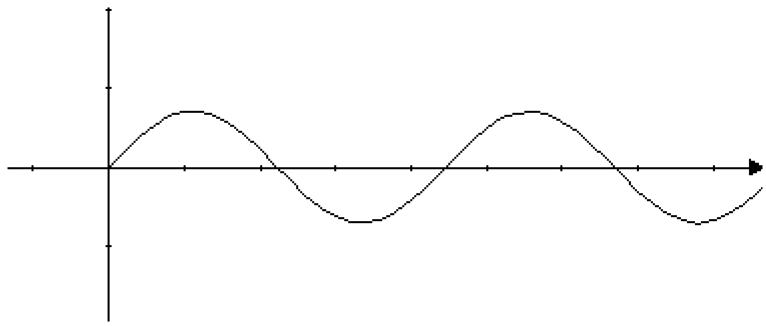
$p_x(t)=c_1\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)+c_2\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)$ oder mit $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ $\quad p_x(t)=c_1\cos\omega t+c_2\sin\omega t$

Für die zeitliche Ortsentwicklung: $\ddot{x}=\frac{\dot{p}_x}{m}=\frac{-kx}{m}\Rightarrow\ddot{x}(t)+\frac{k}{m}x(t)=0$ mit den gleichen Lösungen:

$x(t)=a_1\cos\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)+a_2\sin\left(\sqrt{\frac{k}{m}}t\right)$. Setzt man die Randbedingungen $x(0)=0$ und $\dot{x}(0)=1$,

so erhält man $0=a_1$ und $a_2=\sqrt{\frac{m}{k}}$ und also $x(t)=\sqrt{\frac{m}{k}}\sin\sqrt{\frac{k}{m}}t$

Für $m=1\,kg$ und $k=2\,kg/s^2$ hätte man folgende Entwicklung: $x(t)=\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\sqrt{2}t$



Nun soll noch eine weitere Herleitung der Hamiltonschen Gleichungen aus dem Hamiltonschen Prinzip gegeben werden. Das **Hamiltonsche Prinzip** besagt, dass die zeitliche Entwicklung eines mechanischen Systems so verläuft, dass das Wirkungsintegral $S=\int_{t_1}^{t_2} L\,dt$ stationär ist. Das heißt dass

$$\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2} L\,dt=0 \quad .$$

Das führt einerseits zu den Euler-Lagrange-Gleichungen. Andrerseits eben zu den Hamiltonschen Gleichungen.Die Methode von Lagrange behandelt die Zeitentwicklung eines mechanischen Systems als die Bewegung eines Punktes im Konfigurationsraum. Die Methode von Hamilton dagegen im **Phasenraum.** Für ein System aus N Teilchen hat der Phasenraum die Dimension 6N mit den Achsen $q_i, p_i \; i=1,\ldots,n$ mit $n=3\text{N}$.

Die Hamiltonfunktion ist $H(q_i,p_i,t)=\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_i p_i - L(q_i,\dot{q}_i,t)$ und das Hamiltonsche Prinzip also

$$\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2} L\,dt=\delta\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_i p_i-H(q_i,p_i,t)\right)dt=0$$. In dieser Form geschrieben, nennt man es das

modifizierte Hamiltonsche Prinzip. Es ist von der Form $\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2} f(q,\dot{q},p,\dot{p},t)\,dt=0$.

Die Variationsrechnung zeigt, dass diese Bedingung genau dann zutrifft, wenn die 2n Euler-Lagrange-Gleichungen erfüllt sind:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial f}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial f}{\partial q_i}=0 \quad\text{und}\quad \frac{d}{dt}\frac{\partial f}{\partial \dot{p}_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}=0 \qquad i=1,\dots,n \quad .$$

Auf die obige Form $f(q,\dot{q},p,\dot{p},t)=\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_i p_i-H(q_i,p_i,t)$ angewandt, hat man:

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}\left(\sum_i \dot{q}_i p_i-H(q_i,p_i,t)\right)=\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\sum_i \dot{q}_i p_i-H(q_i,p_i,t)\right)\Leftrightarrow\frac{d}{dt}p_i-0=0-\frac{\partial H}{\partial q_i}\Leftrightarrow\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{p}_i}\left(\sum_i \dot{q}_i p_i-H(q_i,p_i,t)\right)=\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\sum_i \dot{q}_i p_i-H(q_i,p_i,t)\right)\Leftrightarrow 0-0=\dot{q}_i-\frac{\partial H}{\partial p_i}\Leftrightarrow\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i} \quad .$$

In symplektischer Darstellung:

Man wählt die $2n\times 2n-$Matrix $I_n=\begin{pmatrix}\mathbf{0}_n & \mathbf{1}_n\\ -\mathbf{1}_n & \mathbf{0}_n\end{pmatrix}$ wobei $\mathbf{0}_n$ die $n\times n-$Nullmatrix ,

$\mathbf{1}_n$ die $n\times n-$Einheitsmatrix ist, und bezeichnet man mit $\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix}q_1\\ \vdots\\ q_n\\ p_1\\ \vdots\\ p_n\end{pmatrix}$ den 2n-Vektor der

generalisierten Koordinaten und Impulse und mit $\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{\eta}}=\begin{pmatrix}\frac{\partial H}{\partial q_1}\\ \vdots\\ \frac{\partial H}{\partial q_n}\\ \frac{\partial H}{\partial p_1}\\ \vdots\\ \frac{\partial H}{\partial p_n}\end{pmatrix}$, dem 2n-Vektor der partialen

Ableitungen von H bzgl. der Koordinaten und Impulse, so lassen sich die Hamiltonschen Gleichungen $\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$ und $-\dot{p}_i=\frac{\partial H}{\partial q_i}$ $i=1,\dots,n$ als Matrixgleichung zusammenfassen:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}=\boldsymbol{I}_n\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{\eta}} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix}\dot{q}_1\\ \dot{q}_2\\ \vdots\\ \dot{q}_n\\ \dot{p}_1\\ \dot{p}_2\\ \vdots\\ \dot{p}_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&\dots&0&1&0&\dots&0\\ 0&0&\dots&0&0&1&\dots&0\\ \vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\ 0&0&\dots&0&0&0&\dots&1\\ -1&0&\dots&0&0&0&\dots&0\\ 0&-1&\dots&0&0&0&\dots&0\\ \vdots&\vdots&\ddots&\vdots&\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\ 0&0&\dots&-1&0&0&\dots&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{\partial H}{\partial q_1}\\ \frac{\partial H}{\partial q_2}\\ \vdots\\ \frac{\partial H}{\partial q_n}\\ \frac{\partial H}{\partial p_1}\\ \frac{\partial H}{\partial p_2}\\ \vdots\\ \frac{\partial H}{\partial p_n}\end{pmatrix}.$$

Was auch besonders für Computerprogramme vorteilhaft ist.

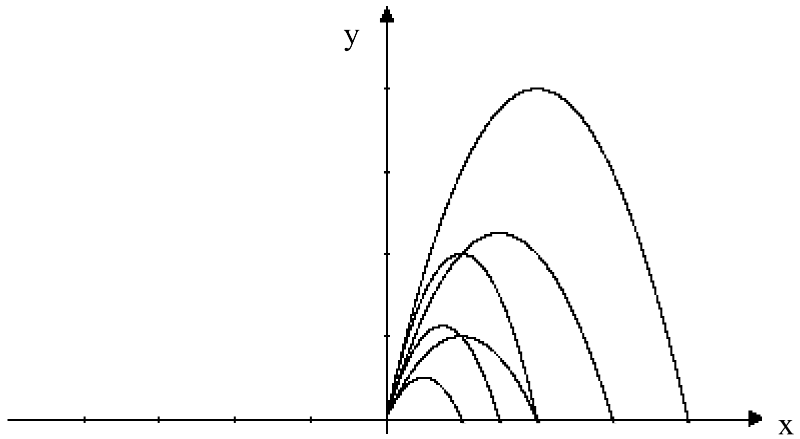
Beispiel: harmonischer Oszillator: $\begin{pmatrix}\dot{q}\\ \dot{p}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1\\ -1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}kq\\ \frac{p}{m}\end{pmatrix}\Leftrightarrow \begin{matrix}\dot{q}=\frac{p}{m}\\ \dot{p}=-kq\end{matrix}$

4.1 Phasenraum und Phasenflüssigkeit

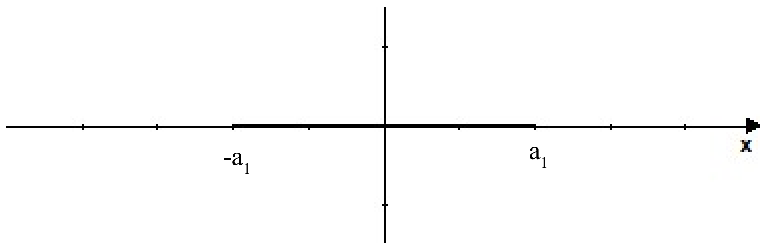
Das Wirkungsintegral $S=\int_{t_1}^{t_2}\left(\sum_{i=1}^{n}\dot{q}_i p_i-H(q_1,\dots,q_n,p_1,\dots,p_n,t)\right)dt$ heißt in dieser Form (als Funktion von q_i und p_i) das **kanonische Integral**. Die Variation dieses Integrals ergab die kanonischen Gleichungen $\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$ und $\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$. Das System wird hier beschrieben in 2n Variablen, $q_1,\dots,q_n;p_1,\dots,p_n$, das als Punkt in einem Raum der Dimension 2n, dem Phasenraum, dargestellt werden kann. Die Lagrangesche Methode verwendet den n-dimensionalen Konfigurationsraum, der nur die generalisierten n Ortskoordinaten $q_1,\dots,q_n$ enthält und nicht die generalisierten Impulse.

Wenn man einen festen Anfangspunkt im **Konfigurationsraum**, etwa den Ursprung, wählt und die zeitliche Entwicklung, d.h. die Trajektorien (Konfigurationsbahnen) untersucht, so gibt es hierfür unendlich viele Möglichkeiten, da die Geschwindigkeit im Konfigurationsraum nicht festgelegt ist. Für jede der unendlich vielen möglichen Geschwindigkeit (Richtung und Größe) gibt es dann eine Trajektorie.

Wirft man etwa einen Körper schräg nach oben mit verschiedenen Geschwindigkeiten und Richtungen, so erhält man als Auswahl folgende Trajektorien, die sich überschneiden können:



Die Trajektorien im Konfigurationsraum des linearen harmonischen Oszillator sind ganz unaufregend:



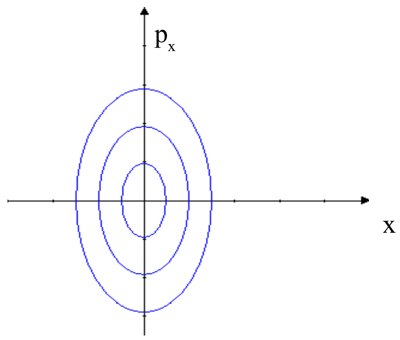
Im **Phasenraum** hingegen (falls H nicht explizit von t abhängt) gibt es nur eine Bahn für einen Startpunkt, da sowohl der Ort als auch der Impuls gegeben ist, sodass sowohl der Geschwindigkeitsbetrag als auch die Bewegungsrichtung festgelegt sind. Die Bahn eines anderen Startpunktes wird die erste Bahn nicht kreuzen, da die kanonischen Gleichungen pro Punkt (q, p) nur eine einzige Bahn im Phasenraum definieren.

Ich wähle wieder den linearen **harmonischen Oszillator**. Er hat die Hamiltonfunktion

$H(x, p_x, t) = \frac{1}{2\mathrm{m}} p_x^2 + \frac{1}{2} k x^2 \qquad \frac{dH}{dt} = 0 \Rightarrow H = const$ H ist mit der Gesamtenergie E identisch.

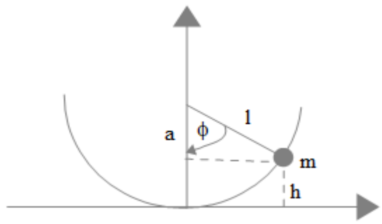
Durch Umformung der Gleichung der Hamilton-Funktion erkennt man, dass die Bahn (Orbit) im $(x, p_x) -$Phasenraum eine Ellipse mit Mittelpunkt $(0,0)$ und den Halbachsen $a = \frac{2E}{k}$ und $b = 2\mathrm{mE}$ ist: $\frac{p_x^2}{2\mathrm{mE}} + \frac{x^2}{\frac{2E}{k}} = 1$, die je nach der Energie größere oder kleinere konzentrische Ellipsen belegt. Für $k = 2$ und $m = 1$

Die größeren Ellipsen gelten für größere Energie.



Ist die Auslenkung x Null, so ist der Impuls und damit die Geschwindigkeit extremal und ist der Impuls (Geschwindigkeit) Null, so ist die Auslenkung extremal.

Ein weiteres Beispiel sei das **Fadenpendel**:



Für die kinetische Energie gilt:

$$T=\frac{1}{2}m v^2 \quad \text{und} \quad s=\phi \cdot l \Rightarrow v=\dot{s}=l\cdot\dot{\phi}\Rightarrow T=\frac{1}{2}m l^2 \dot{\phi}^2$$

Für die potenzielle Energie: $V=mgh=mgl(1-\cos\phi)$,

und damit die Lagrange-Funktion mit $q:=\phi$ $\quad L(q,\dot{q})=T-V=\frac{1}{2}m l^2 \dot{q}^2-mgl(1-\cos q)$.

$$H(q,p)=\dot{q}\,p\ -L(q,\dot{q}) \quad \text{mit} \quad p=\frac{\partial L}{\partial\dot{q}}=ml^2\dot{q}\Rightarrow\dot{q}=\frac{p}{ml^2}$$, also

$$H(q,p)=\frac{p^2}{ml^2}-\frac{1}{2}m l^2\frac{p^2}{m^2 l^4}-mgl(1-\cos q)=\frac{p^2}{2 m l^2}\ -m\,g\,l(1-\cos q)$$ und damit die

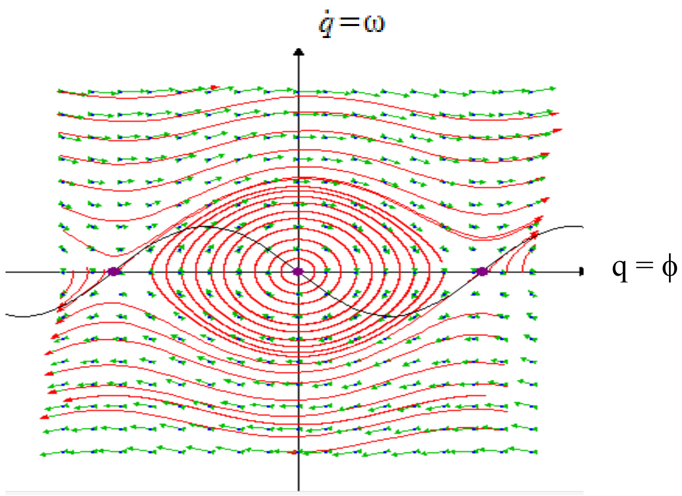
kanonischen Gleichungen: $\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p}=\frac{p}{ml^2}$ und $\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}=mgl\sin q$ und damit die

gekoppelten DGen $\begin{aligned}\dot{q}&=\frac{p}{m l^2}\\ \dot{p}&=mgl\sin q\end{aligned}$, entkoppelt ergibt das $\begin{aligned}\ddot{q}&=\frac{g}{l}\sin q\\ \ddot{p}&=mgl\sin\frac{p}{m l^2}\end{aligned}$

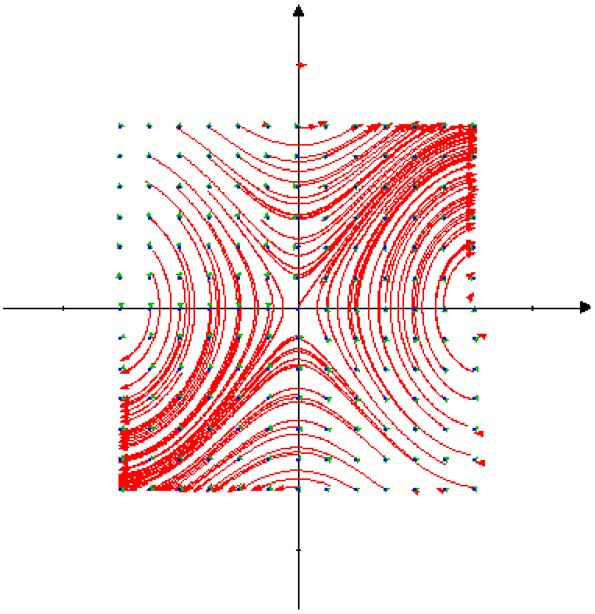
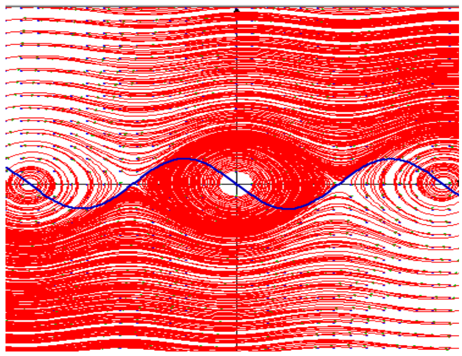
Mit der Näherung $\sin q\approx q$ erhält man für kleine q (Auslenkungen) $\begin{aligned}\ddot{q}-\frac{g}{l}q&=0\\ \ddot{p}-\frac{g}{l}p&=0\end{aligned}$ und also

Die allgemeine Lösung ist: $q(t)=a_1 e^{\sqrt{\frac{g}{l}}t}+a_2 e^{-\sqrt{\frac{g}{l}}t}$ $\quad p(t)=b_1 e^{\sqrt{\frac{g}{l}}t}+b_2 e^{-\sqrt{\frac{g}{l}}t}$

Phasendiagramm in $(q,\dot{q})$



Phasendiagramm in (q, p)

Beide sind im wesentlichen dieselben (verschiedene Ausschnitte und Konstanten). Jede Bahn ist die Lösung des dynamischen Problems mit spezifischen Anfangsbedingungen (q_0, p_0) .

Eine andere Betrachtungsweise der Phasenraumbahnen besteht darin, dass man sich vorstellt, dass das System aus sehr vielen Partikeln (bspw. Wassermoleküle in einem Fluss) besteht, wobei jedes zu einer gegebenen Zeit einen spezifischen Punkt des Phasenraums einnimmt und damit einen spezifischen Ort und spezifischen Impuls innehat. Man kann die grünen Punkte im oberen linken Diagramm sich als solche Teilchen denken zum gegebenen Zeitpunkt. Wenn die Zeit voranschreitet, so fließen die Teilchen entlang der Bahnen. Die Stromlinien kreuzen sich dabei nicht.
Die generelle Lösung des dynamischen Problems wird so durch den gesamten Fluss dargestellt. Man kann so die Begriffe der Fluiddynamik auf Phasenraum anwenden und von Phasenfluss sprechen.
So ist die Geschwindigkeit des Phasenflusses durch die kanonischen Gleichungen gegeben, und das kann interpretiert werden als die Geschwindigkeit des realen Flusses.

In der Fluiddynamik ist man besonders an stationären oder zeitlich konstanten Fluidflüssen interessiert, d.h. dass in jedem Punkt die Geschwindigkeit konstant bleibt, das Geschwindigkeitsfeld nicht von der Zeit abhängt. Für den Phasenfluss bedeutet das, dass $\dot{p}_i$ und $\dot{q}_i$ zeitlich konstant und demnach $\frac{\partial H}{\partial q_i}$ und $\frac{\partial H}{\partial p_i}$ unabhängig von der Zeit sind und H nicht explizit von t abhängt.
Das heißt $\frac{\partial H}{\partial t}=0$. Die totale Zeitableitung von H ist:

$$\frac{dH}{dt}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(-\dot{p}_i\dot{q}_i+\dot{q}_i\dot{p}_i\right)=0\Rightarrow H=constant=E$$, d.h. die Energie wird

erhalten.

$H=E$ definiert einen Hyperfläche im Phasenraum und das Partikel bewegt sich auf dieser Fläche (beim harmonischen Oszillator sind es die Ellipsen, als Hyperflächen des zweidimensionalen Phasenraums).

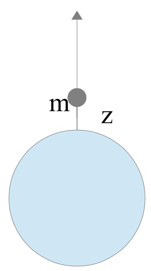
4.2 Zyklische Koordinaten und das Routhsche Verfahren

Wenn eine Koordinate q_k nicht in der Lagrange-Funktion L erscheint aber $\dot{q}_k$, heißt sie zyklisch oder ignorabel.

Wenn also q_k zyklisch ist, gilt $L=L(q_1,\dots,q_{k-1},q_{k+1},\dots,q_n,\dot{q}_1,\dots,\dot{q}_n,t)$.

Die Hamilton-Funktion jedoch wird nur eine Funktion der $n-1$ generalisierten Koordinaten und der $n-1$ generalisierten Impulse sein, denn der konjugierte Impuls $p_k=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$ der zyklischen Koordinate q_k ist konstant: denn es gilt $\frac{\partial L}{\partial q_k}=0$ und aus der Euler-Lagrange-Gleichung $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}-\frac{\partial L}{\partial q_k}=0$ folgt $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}=0$ also ist $\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}=const=\alpha_k$ und damit auch p_k . Also hat man $H=H(q_1,\dots,q_{k-1},q_{k+1},\dots,q_n,p_1,\dots,p_{k-1},\alpha_k,p_{k+1},\dots,p_n)$, da α_k eine Konstante ist, hängt H natürlich nicht im normalen Sinne von α_k ab.

Beispiel: Ein Massenpunkt im nahen Gravitationsfeld eines Körpers.



Für L gilt: $L(z,\dot{x},\dot{y},\dot{z})=T-V=\frac{m}{2}(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)-mgz$, oder in generalisierten Koordinaten

$L(q_3,\dot{q}_1,\dot{q}_2,\dot{q}_3)=\frac{m}{2}(\dot{q}_1{}^2+\dot{q}_2{}^2+\dot{q}_3{}^2)-mg\,q_3$ Hier sind q_1 und q_2 zyklische Variablen.

Bspw. ist $\frac{\partial L}{\partial q_1}=0$ und $p_1=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_1}=m\dot{q}_1$ zeitlich konstant. Analog für q_2 . Die Hamilton-Funktion ist $H=\sum_{i=1}^{3}\dot{q}_i p_i-L(q_3,\dot{q}_1,\dot{q}_2,\dot{q}_3)=\frac{1}{m}p_1^2+\frac{1}{m}p_2^2+\frac{1}{m}p_3^2-\frac{m}{2}(\dot{q}_1{}^2+\dot{q}_2{}^2+\dot{q}_3{}^2)+mg\,q_3=$

$$=\frac{1}{m}p_1^2+\frac{1}{m}p_2^2+\frac{1}{m}p_3^2-\frac{m}{2}\frac{p_1^2}{m^2}-\frac{m}{2}\frac{p_2^2}{m^2}-\frac{m}{2}\frac{p_3^2}{m^2}+mg\,q_3=\frac{p_1^2+p_2^2+p_3^2}{2\mathrm{m}}+mgq_3=H(q_3,\alpha_1,\alpha_2,p_3)\ ,$$

da $p_1=:\alpha_1=const$ und $p_2=:\alpha_2=const$.

Es gilt $\frac{\partial H}{\partial \alpha_1}=\frac{\partial H}{\partial p_1}=\frac{p_1}{m}=\dot{q}_1$ wie bisher für diese kanonische Gleichung.

Das gilt allgemein: Ist q_k zyklisch und $p_k = \alpha_k = const$ der konjugierte Impuls, so gilt weiter die kanonische Gleichung $\frac{\partial H}{\partial \alpha_k} = \dot{q}_k$.

Nehmen wir an, dass die ersten s Koordinaten $q_1, \ldots, q_s$ nicht zyklisch und die letzten $n-s$ Koordinaten $q_{s+1}, \ldots, q_n$ zyklisch sind.
In diesem Fall gibt es ein Verfahren von Edward Routh.
Man definiert der Hamilton-Funktion ähnlich eine sogenannte **Routhsche Funktion**

$R = \sum_{i=s+1}^{n} \dot{q}_i p_i - L(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_n, t)$, wobei $R = R(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_s, p_{s+1}, \ldots, p_n, t)$, da

die Summation nur über die zyklischen Koordinaten geht.

Die partiellen Ableitungen der Routhschen Funktion sind:

$$\frac{\partial R}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} \quad i = 1, \ldots, s \quad ; \quad \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} = -\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad i = 1, \ldots, s \quad (*)$$

und

$$\frac{\partial R}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad i = s+1, \ldots, n \quad \text{da} \quad \frac{\partial R}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \quad ; \quad \frac{\partial R}{\partial p_i} = \dot{q}_i \quad i = s+1, \ldots, n \quad (**)$$

Da für $i = 1, \ldots, s$ die Euler-Lagrange-Gleichungen $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}$ gelten und mit (*) demnach gilt: $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \Leftrightarrow \frac{d}{dt}\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial R}{\partial q_i}$ gelten sie für die Routhsche Funktion für $i = 1, \ldots, s$ auch.

Die Hamilton Gleichungen (kanonischen Gleichungen) $\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$ und $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$ gelten für $i = s+1, \ldots, n$ auch für die Routhsche Funktion R anstatt H gemäß (**), wobei man die Impulse p_i ersetzen kann durch die Konstanten α_i .

Wir haben also eine Mischung aus Lagrange - und Hamilton-Gleichungen.

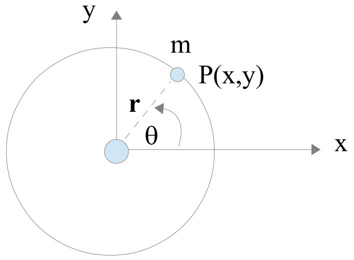
Die Routhsche Funktion kann dann geschrieben werden als

$$R = R(q_1, \ldots, q_s, \dot{q}_1, \ldots, \dot{q}_s, \alpha_{s+1}, \ldots, \alpha_n, t) \quad .$$

Die α_i können mithilfe der Anfangsbedingungen bestimmt werden. Man hat also die Anzahl der Variablen von n auf s reduziert. Später (bei den kanonischen Transformationen) wird man die Anzahl der Variablen sogar auf Null reduzieren können!)

Die Routhsche Funktion ist auch noch nützlich, um die stetige (zeitinvariante) Bewegung zu analysieren. Eine Bewegung heißt stetig, wenn die nicht-zyklischen Variablen konstant sind.

Beispiel 1: Ein Planet, der sich auf einer Kreisbahn bewegt, hat eine stetige Bewegung, da die nicht-zyklische Variable r zeitlich konstant ist. In Polarkoordinaten:



$$T=\frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 \qquad \boldsymbol{r}=\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}r(t)\cos\theta\\r(t)\sin\theta\end{pmatrix}\Rightarrow\dot{\boldsymbol{r}}=\begin{pmatrix}\dot{x}\\\dot{y}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\dot{r}\cos\theta-r\dot{\theta}\sin\theta\\\dot{r}\sin\theta+r\dot{\theta}\cos\theta\end{pmatrix}$$

$$\dot{x}^2=\dot{r}^2\cos^2\theta+r^2\dot{\theta}^2\sin^2\theta-2r\dot{r}\dot{\theta}\sin\theta\cos\theta \qquad \dot{y}^2=\dot{r}^2\sin^2\theta+r^2\dot{\theta}^2\cos^2\theta+2r\dot{r}\dot{\theta}\sin\theta\cos\theta$$

$$\Rightarrow\dot{\boldsymbol{r}}^2=\dot{x}^2+\dot{y}^2=\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2 \quad \text{und also} \quad T=\frac{1}{2}m(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2)$$

$$V=-G\frac{M\,m}{r}=-\frac{k}{r} \quad \text{und also} \quad L(r,\dot{r},\dot{\theta})=\frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2+r^2\dot{\theta}^2\right)+\frac{k}{r}$$

θ ist zyklisch und wächst linear mit der Zeit. Der lineare Zuwachs zyklischer Variablen ist typisch für stetige Bewegungen.

Bei der stetigen Bewegung sind, wie gesagt, die nicht-zyklischen Variablen konstant.

Für Systeme mit einer Routhschen Funktion der Form $R=R(q_1,\ldots,q_s,\dot{q}_1,\ldots,\dot{q}_s,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_n,t)$. Die Bewegungsgleichungen für die zyklischen Koordinaten

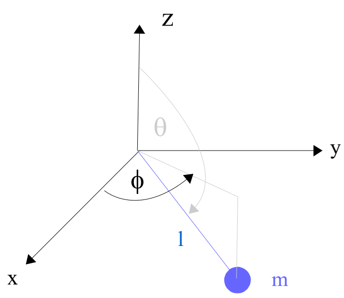
$$\frac{\partial R}{\partial q_i}=-\dot{p}_i \quad \text{und} \quad \frac{\partial R}{\partial p_i}=\dot{q}_i \quad \text{bzw.} \quad \frac{\partial R}{\partial \alpha_i}=\dot{q}_i \quad \text{für} \quad i=s+1,\ldots,n$$

besagen, dass $\dot{q}_i=\dot{q}_i(q_1,\ldots,q_s,\dot{q}_1,\ldots,\dot{q}_s,\alpha_{s+1},\ldots,\alpha_n)$ für $i=s+1,\ldots,n$.

Bei stetigen Bewegungen sind die $q_1,\ldots,q_s$ als nicht-zyklische Koordinaten konstant und

demnach die Geschwindigkeiten $\dot{q}_{1,}\ldots,\dot{q}_s$ jeweils Null, die Geschwindigkeiten der zyklischen Koordinaten $\dot{q}_{s+1},\ldots,\dot{q}_n$ sind zeitlich konstant und das heißt, dass die $q_{s+1},\ldots,q_n$ lineare Funktionen der Zeit sind.

Beispiel 2: sphärisches Pendel



$$L=\frac{1}{2}m(\dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2)-mg(z+l) \qquad x=l\sin\theta\cos\phi \qquad y=l\sin\theta\sin\phi \qquad z=l\cos\theta$$, also

$\dot{x}=l(\dot{\theta}\cos\theta\cos\phi-\dot{\phi}\sin\phi\sin\theta)$ und

$\dot{x}^2=l^2(\dot{\theta}^2\cos^2\theta\cos^2\phi+\dot{\phi}^2\sin^2\theta\sin^2\phi-2\dot{\theta}\dot{\phi}\sin\theta\sin\phi\cos\theta\cos\phi)$

$\dot{y}=l(\dot{\theta}\cos\theta\sin\phi+\dot{\phi}\sin\theta\cos\phi)$ und

$\dot{y}^2=l^2(\dot{\theta}^2\cos^2\theta\sin^2\phi+\dot{\phi}^2\sin^2\theta\cos^2\phi+2\dot{\theta}\dot{\phi}\sin\theta\sin\phi\cos\theta\cos\phi)$

$\dot{z}=-l\dot{\theta}\sin\theta$ und $\dot{z}^2=l^2\dot{\theta}^2\sin^2\theta \quad \Rightarrow \dot{x}^2+\dot{y}^2+\dot{z}^2=l^2(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2\sin^2\theta)$ und damit

$$L=\frac{1}{2}ml^2(\dot{\theta}^2+\dot{\phi}^2\sin^2\theta)-mgl(1+\cos\theta)=L(\theta,\dot{\theta},\dot{\phi})$$

Oder mit $q_1=\phi$ und $q_2=\theta$ $\quad L=\frac{1}{2}ml^2(\dot{q}_2{}^2+\dot{q}_1{}^2\sin^2 q_2)-mgl(1+\cos q_2)=L(q_2,\dot{q}_2,\dot{q}_1)$

$p_1=\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_1}=(ml^2\sin^2 q_2)\dot{q}_1\Rightarrow\dot{q}_1=\frac{p_1}{ml^2\sin^2 q_2}$ und $p_2=\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_2}=ml^2\dot{q}_2\Rightarrow\dot{q}_2=\frac{p_2}{ml^2}$, damit ist die

Hamilton-Funktion

$$H=\dot{q}_1 p_1+\dot{q}_2 p_2-L=\frac{p_1^2}{ml^2\sin^2 q_2}+\dot{q}_2 p_2-\frac{1}{2}ml^2\dot{q}_2{}^2-\frac{p_1^2}{2ml^2\sin^2 q_2}+mgl(1+\cos q_2)$$ oder

$$H=\frac{p_1^2}{2\mathrm{ml}^2\sin^2 q_2}+\dot{q}_2(p_2-\frac{1}{2}ml^2\dot{q}_2)+mgl(1+\cos q_2)=\frac{p_1^2}{2\mathrm{ml}^2\sin^2 q_2}+\frac{p_2^2}{2\mathrm{ml}^2}+mgl(1+\cos q_2)$$

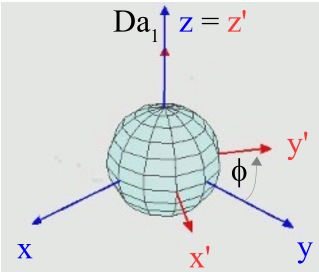
$H=H(q_2,\alpha_1,p_2)$ mit zyklischer Variable q_1 und $\alpha_1=p_1$.

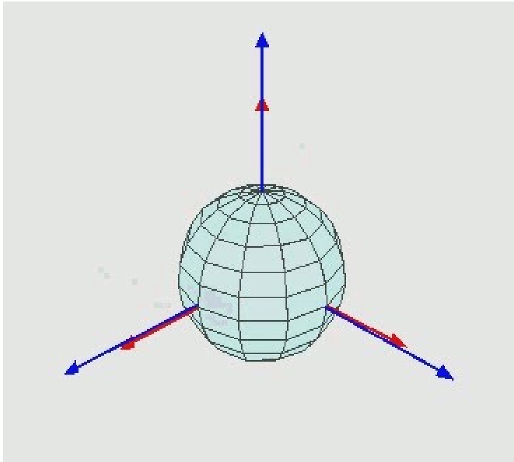
Die Routhsche Funktion ist $R=\dot{q}_1 p_1-L=\frac{p_1^2}{ml^2\sin^2 q_2}-\frac{1}{2}ml^2\dot{q}_2{}^2-\frac{p_1^2}{2\mathrm{ml}^2\sin^2 q_2}+mgl(1+\cos q_2)\Rightarrow$

$$R=\frac{p_1^2}{2ml^2\sin^2 q_2}-\frac{1}{2}ml^2\dot{q}_2{}^2+mgl(1+\cos q_2)=R(q_2,\dot{q}_2,\alpha_1)$$.

Beispiel 3: Die Eulerwinkel sind drei unabhängige Winkel, die man auf folgende Art erhalten kann:

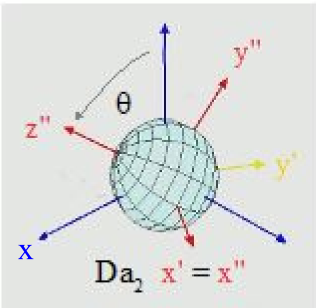
1. man dreht das Koordinatensystem x,y,z um den Winkel ϕ um die z-Achse. Dabei sei die x-Achse nach der Drehung mit x' bezeichnet.

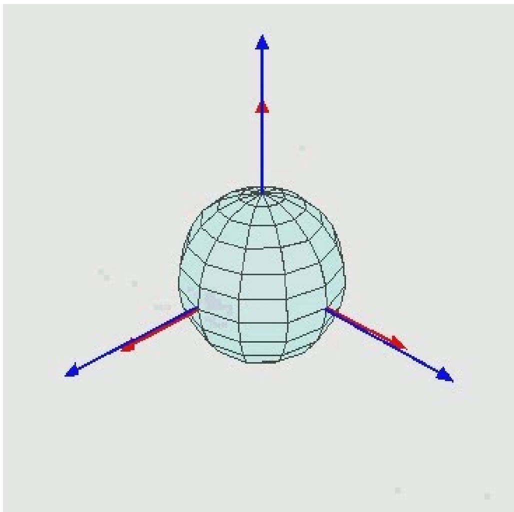




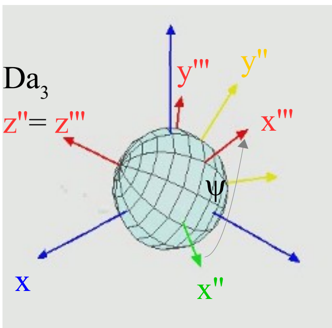
Aus Wikipedia

2. Dann wird das gedrehte Koordinatensystem um die x'-Achse um den Winkel θ gedreht. Dabei geht die y'-Achse in die y''-Achse, die z'-Achse in die z''-Achse über.





3. Es wird noch das nun zweifach gedrehte Koordinatensystem um um die z''-Achse mit dem Winkel ψ gedreht



Die Drehmatrizen sind

$$D_\phi=\begin{pmatrix}\cos\phi & \sin\phi & 0\\ -\sin\phi & \cos\phi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\quad D_\theta=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & \sin\theta\\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\quad D_\psi=\begin{pmatrix}\cos\psi & \sin\psi & 0\\ -\sin\psi & \cos\psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\quad \text{und die}$$

Drehmatrix für die gesamte Drehung ist

$$D=D_\psi D_\theta D_\phi=\begin{pmatrix}\cos\phi\cos\psi-\sin\phi\cos\theta\sin\psi & \sin\phi\cos\psi+\cos\phi\cos\theta\sin\psi & \sin\theta\sin\psi\\ -\cos\phi\sin\psi-\sin\phi\cos\theta\cos\psi & -\sin\phi\sin\psi+\cos\phi\cos\theta\cos\psi & \sin\theta\cos\psi\\ \sin\phi\sin\theta & -\cos\phi\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}$$

Es soll nun die Lagrange-Funktion für einen (drehenden) freien **Kreisel** mithilfe von Eulerwinkeln beschrieben werden:

4.3 Kanonische Transformationen und Poisson-Klammern

4.3.1 Kanonische Transformationen

Die Hamiltonschen Gleichungen sind im allgemeinen einfacher zu integrieren, da sie Gleichungen erster Ordnung sind im Gegensatz zu den Lagrange-Gleichungen, die ja den Term $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot q}$ enthalten. Weiter ist bei einer zyklischen Variablen q der konjugierte Impuls $p=\frac{\partial L}{\partial \dot q}$ konstant, was für die Integration von Vorteil ist. Es ist also günstig möglichst viele zyklische Variablen zu haben. Jacobi hat nun eine Methode entwickelt, bei der eine Koordinatentransformation von q_i, p_i nach Q_i, P_i (um eine andere Bezeichnung zu haben) unter Beibehaltung der Form der kanonischen Hamilton-Gleichungen möglich ist, die unter Umständen zyklische Variablen erzeugt. Gesucht ist also eine geeignete Funktion, die die Koordinaten auf günstige Weise verändern.

Die bisherige Koordinatentransformation , die die kartesischen Koordinaten in generalisierte umformte, war eine sogenannte „Punkttransformation“, da sie den Punkt $(x_1, \ldots, x_n)$ im n-dimensionalen Konfigurationsraum in einen Punkt $(q_1, \ldots, q_n)$ in einem anderen Konfigurationsraum umformte:

$$x_i=x_i(q_1, \ldots, q_n, t) \qquad i=1, \ldots, n$$

Dann gab es die Legendre Transformation, die von der Lagrangefunktion $L(q, \dot q, t)$ nach $H(q, p, t)$, der Hamiltonfunktion transformierte.

Jetzt soll eine besonders wichtige Transformation, die sogenannte kanonische Transformation betrachtet werden, die von einem Phasenraum in einen anderen Phasenraum umbildet unter Beibehaltung der Form der Hamilton-Gleichungen.

Die neuen Koordinaten Q_i, P_i genügen auch den Hamilton-Gleichungen, aber in einer anderen funktionalen Abhängigkeit. Um das zu markieren, wählt man ein anderes Zeichen, anstatt H vielleicht K. Die Hamilton-Gleichungen in der alten Form von H lauteten:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{und} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

Nach der Transformation erhält man in K

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \qquad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

Eine Art die Hamilton-Gleichungen zu erhalten bestand darin, von dem modifizierten Hamiltonprinzip auszugehen und die Variation des Wirkungsintegrals Null zu setzen, also nach einer stationären Wert zu suchen:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i \dot{q}_i p_i - H(q_i, p_i, t) \right) dt = 0 \quad (1)$$

Wir versuchen also die neuen Gleichungen zu erhalten, indem wir

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i \dot{Q}_i P_i - K(Q_i, P_i, t) \right) dt = 0 \quad (2)$$

ansetzen. Da für eine beliebige Funktion F, die abhängig ist von Koordinaten q_i, Q_i, p_i, P_i und der Zeit t, und deren Variation an den Endpunkten Null ist, gilt:

$$\delta \int_{t_1}^{t_1} \frac{dF}{dt} dt = \delta(F(t_2) - F(t_1)) = 0$$

und daher sind die Gleichung (2) und

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left(\sum_i \dot{Q}_i P_i - K(Q_i, P_i, t) + \frac{dF}{dt} \right) dt = 0 \quad (3)$$

äquivalent. Wenn die Gleichheiten

$$\dot{q}_i p_i - H = \dot{Q}_i P_i - K + \frac{dF}{dt} \quad \text{gelten} \quad i = 1, \ldots, n \quad , \ (4)$$

dann besagt (1) und (3) genau das Gleiche. Also kann man aus (3) die Hamilton-Gleichungen für K, Q und P ableiten.
Man kann bspw. F in Abhängigkeit von q_i, Q_i, t wählen: $F = F_1(q_i, Q_i, t)$. Dann wird (4)

zu $\dot{q}_i p_i - H = \dot{Q}_i P_i - K + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial t}$ oder nach Zusammenfassung zu

$$\left(p_i-\frac{\partial F_1}{\partial q_i}\right)\dot{q}_i-\left(P_i+\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}\right)\dot{Q}_i=H-K+\frac{\partial F_1}{\partial t} \quad .$$

Wählt man F_1 nun genauer so, dass $\frac{\partial F_1}{\partial q_i}=p_i$ (5) und $\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}=-P_i$ (6) und $\frac{\partial F_1}{\partial t}=K-H$ (7) so ist (4) erfüllt. Wir haben also aus (3) die neuen Hamiltonschen Gleichungen:

$$\dot{Q}_i=\frac{\partial K}{\partial P_i} \quad \text{und} \quad \dot{P}_i=-\frac{\partial K}{\partial Q_i}$$

Mit (7) oder nach K aufgelöst: $K=H+\frac{\partial F}{\partial t}$ hat man die neue Hamilton-Funktion.

Da weiter F_1 eine Funktion in q_i und Q_i ist, wird auch $\frac{\partial F}{\partial t}$ eine Funktion in q_i und Q_i sein. Mit Gleichung (5) wird $p_i=p_i(q_i,Q_i,t)$ sein, oder wenn man nach Q auflöst, erhält man $Q_i=Q_i(q_i,p_i,t)$. Gleichung (6) ergibt $P_i=P_i(q_i,p_i,t)$.

Beispiel 1: Wir wählen $F_1=F_1(q,Q,t)=qQ$. Gleichung (7) ergibt dann $K=H+\frac{\partial F_1}{\partial t}=H$, also $K=H$. Die spezielle kanonische Transformation ist nach (6) $P=-\frac{\partial F_1}{\partial Q}=-q$, also $P=-q$ und nach (5) $p=\frac{\partial F_1}{\partial q}=Q$, also $Q=p$, also $\begin{matrix}P=-q\\Q=p\end{matrix}$. Die Transformation vertauscht im Wesentlichen Koordinate und Impuls. Daher ist es auch gerechtfertigt, auch den Impuls zu den Koordinaten zu rechnen. Wir haben hier zwar keine zyklische Koordinate, das ergibt dann Beispiel 3.

Zunächst sollen aber noch andere nützliche erzeugende Funktionen F angegeben werden, die sowohl neue als auch alte Variablen beinhalten sollten:

$$\begin{aligned}F&=F_1(q_i,Q_i,t)\\F&=F_2(q_i,P_i,t)\\F&=F_3(p_i,Q_i,t)\\F&=F_4(p_i,P_i,t)\end{aligned}$$

Die zu den letzten drei Funktionen F gehörenden Gleichungen sind:

$$\begin{matrix}p_i=\frac{\partial F_2}{\partial q_i} & & q_i=-\frac{\partial F_3}{\partial p_i} & & q_i=-\frac{\partial F_4}{\partial p_i}\\ Q_i=\frac{\partial F_2}{\partial P_i} & \text{bzw.} & P_i=-\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} & \text{bzw.} & Q_i=\frac{\partial F_4}{\partial P_i}\\ K=H+\frac{\partial F_2}{\partial t} & & K=H+\frac{\partial F_3}{\partial t} & & K=H+\frac{\partial F_4}{\partial t}\end{matrix}$$

Beispiel 2: Sei $F_2=\sum_i q_i P_i$, dann ist $K=H+\frac{\partial F_2}{\partial t}=H$ und $Q_i=\frac{\partial F_2}{\partial P_i}=q_i$ und $p_i=\frac{\partial F_2}{\partial q_i}=P_i$, was offensichtlich die identische Transformation ist.

Beispiel 3: Es soll nun eine kanonische Transformation das Problem des harmonischen Oszillators lösen.

Die Hamilton-Funktion ist $H(q,p,t)=\frac{1}{2\text{m}}p^2+\frac{1}{2}kq^2$ oder mit $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ hat man $k=m\omega^2$

und damit $H(q,p)=\frac{1}{2\text{m}}p^2+\frac{1}{2}kq^2=\frac{1}{2\text{m}}\left(p^2+m^2\omega^2q^2\right)$ (*). Die kanonische Transformation sei

$F=F_1(q,Q)=\frac{m\omega}{2}q^2\cot Q$. Aus Gleichung (5) erhält man

$p=\frac{\partial F_1}{\partial q}=m\omega q\cot Q$ (**). Aus Gleichung (6)

$P=-\frac{\partial F_1}{\partial Q}=\frac{m\omega q^2}{2\sin^2 Q}$ (***) und aus Gleichung (7)

$K=H+\frac{\partial F}{\partial t}$ oder $K(Q,P)=H(q,p)$.

Aus (***) folgt $q^2=\frac{2}{m\omega}P\sin^2 Q$ (****) und aus (**)

$$p^2=m^2\omega^2q^2\frac{\cos^2 Q}{\sin^2 Q}\overset{(****)}{=}m^2\omega^2\left(\frac{2}{m\omega}P\sin^2 Q\right)\frac{\cos^2 Q}{\sin^2 Q}=2m\omega P\cos^2 Q$$, also $p^2=2m\omega P\cos^2 Q$

Also mit (*) $K(P,Q)=\frac{1}{2\text{m}}\left(p^2+m^2\omega^2q^2\right)=\frac{1}{2\text{m}}\left(2m\omega P\cos^2 Q+m^2\omega^2\left(\frac{2}{m\omega}P\sin^2 Q\right)\right)=$

$=\omega P\cos^2 Q+\omega P\sin^2 Q=\omega P\left(\cos^2 Q+\sin^2 Q\right)=\omega P$, also $K(P,Q)=\omega P$. Diese

Hamiltonsche Funktion ist *zyklisch in Q*. Dann ist aber P als konjugierter Impuls konstant und die Hamilton-Funktion ist konstant und die Gesamtenergie E: $E=\omega P$ oder $P=\frac{E}{\omega}$.
Hamiltons Gleichung für Q ist: $\dot{Q}=\frac{\partial K}{\partial P}=\omega$. Das kann unmittelbar integriert werden:
$Q=\omega t+c$. Transformiert man wieder zurück zu den ursprünglichen Variablen, ergibt das mit

$q^2=\frac{2}{m\omega}P\sin^2 Q$: $q^2=\frac{2\text{P}}{m\omega}\sin^2(\omega t+c)\Rightarrow q=\sqrt{\frac{2\text{P}}{m\omega}}\sin(\omega t+c)\overset{P=\frac{E}{\omega}}{=}\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin(\omega t+c)$ und damit ist die Lösung gefunden: $q(t)=\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\sin(\omega t+c)$.

Das war natürlich ein großer Aufwand für ein kleines Problem. Die Hamiltonsche Methode ist eher ein theoretisches als ein praktisches Werkzeug. In der Quantenmechanik ist sie jedoch beides und i.A. die einzig sinnvolle Methode dort Probleme zu lösen.

4.3.2 Poisson-Klammern

Die Poisson-Klammern sind ein Differenzialoperator und vorallem auch nützlich um von der klassischen Mechanik zur Quantenmechanik zu kommen.

Wenn q und p die kanonischen Variablen sind und $f=f(q,p,t)$ $,g=g(q,p,t)$ Funktionen von ihnen, so wird die **Poisson-Klammer** von u und v folgendermaßen definiert:

$$\{f,g\}_{q,p}:=\frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p}-\frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q}$$

Auf ein System vom Freiheitsgrad n verallgemeinert mit $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$ und $\boldsymbol{q}=(q_1,\dots,q_n)$ und $\boldsymbol{p}=(p_1,\dots,p_n)$ ist das

$$\{f,g\}:=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)$$

Mit der Einsteinschen Summenkonvention hat man

$$\{f,g\}=\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}$$

Es gelten die Beziehungen (**Fundamentale Poisson-Klammern**):

$$\{q_j,q_k\}=\{p_j,p_k\}=0 \quad \text{(1) und}$$

$$\{q_j,p_k\}=-\{p_j,q_k\}=\delta_{jk} \quad (2)$$

Beweis: (1) Für $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=q_j$ und $g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=q_k$ ist die Poisson-Klammer

demnach $\{q_j,q_k\}:=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial q_j}{\partial q_i}\frac{\partial q_k}{\partial p_i}-\frac{\partial q_j}{\partial p_i}\frac{\partial q_k}{\partial q_i}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(\delta_{ij}\cdot 0-0\cdot\delta_{ik}\right)=0$

Für $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=p_j$ und $g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=p_k$ gilt für die Poisson-Klammer

$$\{p_j,p_k\}:=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial p_j}{\partial q_i}\frac{\partial p_k}{\partial p_i}-\frac{\partial p_j}{\partial p_i}\frac{\partial p_k}{\partial q_i}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(0\cdot\delta_{ik}-\delta_{ij}\cdot 0\right)=0$$

(2) Für $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=q_j$ und $g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=p_k$ ist die Poisson-Klammer

$$\{q_j,p_k\}:=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial q_j}{\partial q_i}\frac{\partial p_k}{\partial p_i}-\frac{\partial q_j}{\partial p_i}\frac{\partial p_k}{\partial q_i}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(\delta_{ij}\cdot\delta_{ik}-0\cdot 0\right)=\delta_{jk}$$

Und für $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=p_j$ und $g(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)=q_k$ gilt für die Poisson-Klammer

$$\{p_j,g_k\}:=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial p_j}{\partial q_i}\frac{\partial q_k}{\partial p_i}-\frac{\partial p_j}{\partial p_i}\frac{\partial q_k}{\partial q_i}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(0\cdot 0-\delta_{ij}\cdot\delta_{ik}\right)=-\delta_{jk}$$

Es gelten weiter folgende **Regeln**:

(Antisymmetrie) $\{f,g\}=-\{g,f\}$

(Bilinearität) $\{af+bg,h\}=a\{f,h\}+b\{g,h\}$, $\{h,af+bg\}=a\{h,f\}+b\{h,g\}$

(Leibniz-Regel)
oder
(Produktregel) $\{f\cdot g,h\}=\{f,h\}\cdot g+f\cdot\{g,h\}$

(Jacobi-Identität) $\{f,\{g,h\}\}+\{g,\{h,f\}\}+\{h,\{f,g\}\}=0$

(kanon. Invarianz) $\{f,g\}_{q,p}=\{f,g\}_{Q,P}$ unter kanonischer Transformation

Es gelten noch zusätzliche Regeln:

$\{f,f\}=0$ (3) und $\{f,c\}=0$ (4) für alle f , falls c konstante Funktion über dem Phasenraum $\{(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})\}$

Beweis: (3) $\{f,f\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i}\right)=0$, da die Produkte in der Klammer identisch sind. (4) $\{f,c\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial c}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial c}{\partial q_i}\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\cdot 0-\frac{\partial f}{\partial p_i}\cdot 0\right)=0$

(Antisymmetrie) $\{f,g\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)=-\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial g}{\partial q_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}-\frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i}\right)=-\{g,f\}$

(Invarianz) Da $g=g(\boldsymbol{Q},\boldsymbol{P})$ ist $\frac{\partial g}{\partial p_i}=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i}+\frac{\partial g}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}\right)$ und

$\frac{\partial g}{\partial q_i}=\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}+\frac{\partial g}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial q_i}\right)$ folgt für $\{f,g\}_{q,p}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)=$

$$=\sum_{i,k}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i}+\frac{\partial g}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}\right)-\frac{\partial f}{\partial p_i}\left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}+\frac{\partial g}{\partial P_k}\frac{\partial P_k}{\partial q_i}\right)\right)=$$

$$=\sum_{i,k}\left[\frac{\partial g}{\partial Q_k}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial g}{\partial P_k}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial P_k}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial P_k}{\partial q_i}\right)\right]=$$

$$=\sum_k \left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\{f,Q_k\}_{q,p} + \frac{\partial g}{\partial P_k}\{f,P_k\}_{q,p} \right) \quad (*)$$

da $\{f,Q_k\}_{q,p} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial Q_k}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial Q_k}{\partial q_i} \right)$, $\{f,P_k\}_{q,p} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial P_k}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial P_k}{\partial q_i} \right)$.

Setzt man in (*) für $f = Q_l$, dann erhält man mit (1) und (2):

$\{Q_l, g\} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\{Q_l,Q_k\} + \frac{\partial g}{\partial P_k}\{Q_l,P_k\} \right) = \frac{\partial g}{\partial P_l} \overset{\text{Antisymmetrie}}{\Rightarrow} \{g,Q_l\} = -\frac{\partial g}{\partial P_l}$ und setzt man

hierin für $g = f$, hat man $\{f,Q_l\} = -\frac{\partial f}{\partial P_l}$ (**).

Setzt man diesmal in (*) für $f = P_l$, ergibt das wiederum mit (1) und (2):

$\{P_l, g\} = \sum_{k=1}^{n} \left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\{P_l,Q_k\} + \frac{\partial g}{\partial P_k}\{P_l,P_k\} \right) = -\frac{\partial g}{\partial Q_l} \overset{\text{Antisymmetrie}}{\Rightarrow} \{g,P_l\} = \frac{\partial g}{\partial Q_l}$ und nach

Ersetzung von g durch f: $\{f,P_l\} = \frac{\partial f}{\partial Q_l}$ (***).

Geht man mit (**) und (***) in (*), so ist das

$$\{f,g\}_{q,p} = \sum_k \left(\frac{\partial g}{\partial Q_k}\{f,Q_k\}_{q,p} + \frac{\partial g}{\partial P_k}\{f,P_k\}_{q,p} \right) = \sum_k \left(\frac{\partial g}{\partial Q_k} \cdot \left(-\frac{\partial f}{\partial P_k} \right) + \frac{\partial g}{\partial P_k}\frac{\partial f}{\partial Q_k} \right)$$

$$\{f,g\}_{q,p} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial Q_k}\frac{\partial g}{\partial P_k} - \frac{\partial f}{\partial P_k}\frac{\partial g}{\partial Q_k} \right) = \{f,g\}_{Q,P} \quad .$$

(Bilinearität) $\{af+bg,h\} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial(af+bg)}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial(af+bg)}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i} \right) =$

$$= \sum_i \left[\left(a\frac{\partial f}{\partial q_i} + b\frac{\partial g}{\partial q_i} \right)\frac{\partial h}{\partial p_i} - \left(a\frac{\partial f}{\partial p_i} + b\frac{\partial g}{\partial p_i} \right)\frac{\partial h}{\partial q_i} \right] =$$

$$= \sum_i \left[a\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i} \right) + b\left(\frac{\partial g}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i} \right) \right] =$$

$$= a\sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i} \right) + b\sum_i \left(\frac{\partial g}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i} \right) = a\{f,h\} + b\{g,h\} \quad .$$

Die andere Seite ergibt sich mit der Antisymmetrie:

$\{h,af+bg\} = -\{af+bg,h\} = -a\{f,h\} - b\{g,h\} = a\{h,f\} + b\{h,g\}$.

(Leibniz-Regel)

$$\{f\cdot g,h\}=\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial fg}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i}-\frac{\partial fg}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i}\right)=\sum_i\left[\left(g\frac{\partial f}{\partial q_i}+f\frac{\partial g}{\partial q_i}\right)\frac{\partial h}{\partial p_i}-\left(g\frac{\partial f}{\partial p_i}+f\frac{\partial g}{\partial p_i}\right)\frac{\partial h}{\partial q_i}\right]=$$

$$=g\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i}\right)+f\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial g}{\partial q_i}\frac{\partial h}{\partial p_i}-\frac{\partial g}{\partial p_i}\frac{\partial h}{\partial q_i}\right)=g\cdot\{f,h\}+f\cdot\{g,h\}$$

Bemerkung 1: Die Antisymmetrie, die Bilinearität und die Jacobi-Identität machen die Poisson-Klammer zu einer speziellen Lie-Klammer.

Bemerkung 2: Beziehungen, die Poisson-Klammern beinhalten können in quantenmechanische Beziehungen transformiert werden, wenn die Poisson-Klammern mit dem quantenmechanischen Kommutator durch folgende Vorschrift:

$$\{f,g\}\rightarrow\frac{1}{i\hbar}\left(\hat{f}\,\hat{g}-\hat{g}\,\hat{f}\right)=\frac{1}{i\hbar}[\hat{f},\hat{g}]$$

wobei f und g klassische Funktionen sind und $\hat{f}$ und $\hat{g}$ die entsprechenden quantenmechanischen Operatoren.

4.4 Bewegungsgleichungen in Poisson-Klammern

Die Bewegungsgleichungen kann man in mindestens drei Arten ausdrücken, mit Newton 2. Gesetz, mit den Euler-Lagrange-Gleichungen oder mit Hamiltons Gleichungen. Die ersten beiden sind ein System von n DG 2. Ordnung, Hamiltons Gleichungen sind ein System aus 2n DG 1.Ordnung, von $\dot{q}$ und $\dot{p}$.

Wenn f eine Funktion über dem Phasenraum ist: $f=f(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p},t)$, dann ist

$$\frac{df}{dt}=\sum_i\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i+\frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i\right)+\frac{\partial f}{\partial t}$$

Mit den kanonischen Gleichungen $\dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}$ und $\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i}$ ergibt das

$$\frac{df}{dt}=\sum_i\left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i}-\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)+\frac{\partial f}{\partial t}\quad\text{oder}\quad\frac{df}{dt}=\{f,H\}+\frac{\partial f}{\partial t}\ .$$

Ist f konstant, also $\frac{df}{dt}=0$ ist $\{f,H\}=-\frac{\partial f}{\partial t}$ (genau dann ist f eine Erhaltungsgröße) und wenn f nicht explizit von der Zeit abhängt, dann ist mit $\frac{\partial f}{\partial t}=0$ auch $\{f,H\}=0$. In der Quantenmechanik entspricht das, dass $\hat{f}$ und $\hat{H}$ kommutieren. Alle Erhaltungsgrößen kommutieren mit dem Hamiltonoperator $\hat{H}$.

Wird nun $f=q$ gesetzt (q hängt nicht explizit von der Zeit ab), dann ist $\{q,H\}=\dot{q}$ und für $f=p$ ergibt sich analog $\{p,H\}=\dot{p}$. Also

$$\begin{aligned}\dot{q}&=\{q,H\}\\ \dot{p}&=\{p,H\}\end{aligned} \quad (1)$$

Das sind die Hamiltonschen Gleichungen in Poisson-Klammer Schreibweise.

Wird $f=H$ gesetzt, so ist $\frac{dH}{dt}=\{H,H\}+\frac{\partial H}{\partial t}$ oder $\frac{dH}{dt}=\frac{\partial H}{\partial t}$.

In symplektischer Darstellung mit $\boldsymbol{\eta}=\begin{pmatrix} q_1\\ \vdots\\ q_n\\ p_1\\ \vdots\\ p_n\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{q}\\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix}$ wird (1) zu:

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}=\{\boldsymbol{\eta},H\}$$

was als Vorschrift gelesen werden kann, um die Werte der $\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}$ zu etwas späterer Zeit zu bestimmen, wenn ihre Werte zur Zeit t bekannt sind, denn

$$\boldsymbol{\eta}(t+dt)=\boldsymbol{\eta}(t)+\dot{\boldsymbol{\eta}}\,dt \quad .$$

4.4.1 Infinitesimale kanonische Transformationen